

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 1993/94

April 1994

KUA 275 - Pengantar Spektroskopi Molekul

Masa : (2 jam)

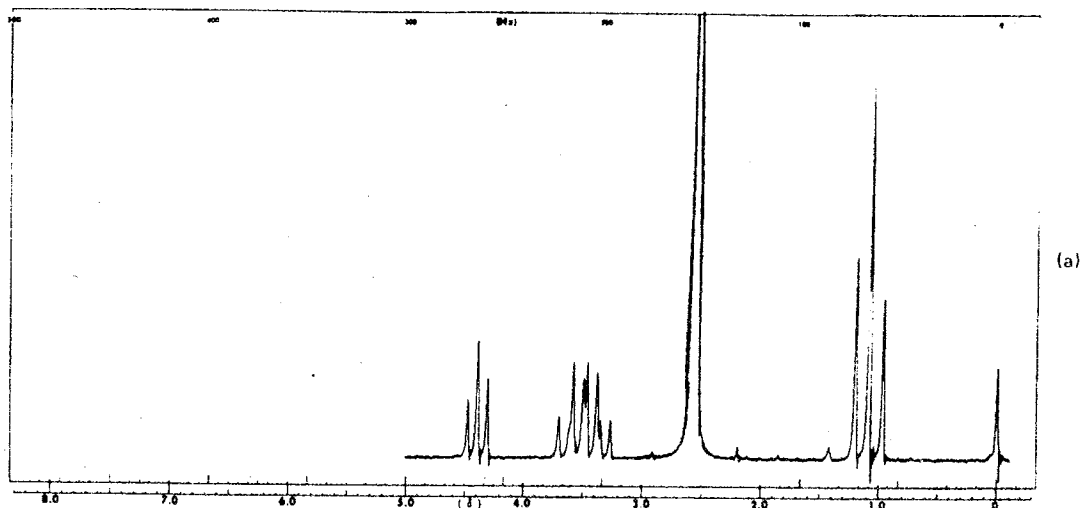
Jawab sebarang EMPAT soalan.

Hanya EMPAT jawapan yang pertama sahaja akan diperiksa.

Jawab tiap-tiap soalan pada muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi LIMA soalan semuanya (5 muka surat).

1. (a) Dengan memberikan hujah-hujah anda sesuaikan spektrum NMR di bawah dengan struktur yang paling mungkin jika formula sebatianannya ialah C_2H_6O .



(9 markah)

- (b) Tentukan pemalar-pemalar pengkupelan J yang ada dalam spektrum di (a) di atas.

(8 markah)

- (c) Ramalkan rupabentuk spektrum ESR bagi radikal molekul di (a) di atas serta radikal benzena.

(8 markah)

2. Kedudukan jalur spektrum penyerapan mikrogelombang bagi molekul H^{35}Cl pada suhu 300 K adalah seperti berikut:

$\bar{\nu}/\text{cm}^{-1}$	Keamatan	$\Delta\bar{\nu}/\text{cm}^{-1}$
124.30	rendah	0
145.03	sederhana	20.73
165.51	sederhana	20.48
185.86	maksimum	20.35
206.38	sederhana	20.52
226.50	rendah	20.12

- (a) Jelaskan perubahan jarak antara jalur dalam spektrum tersebut.

(8 markah)

- (b) Tentukan peralihan-peralihan $J \longrightarrow J'$ yang menerbitkan setiap jalur di atas.

(10 markah)

- (c) Tentukan pemalar daya erut pengemparan dan frekuensi getaran asas bagi molekul tersebut.

(7 markah)

3. (a) Peralihan asas dan overton pertama untuk $N^{14}O^{16}$ berlaku pada 1876.06 cm^{-1} dan 3724.20 cm^{-1} . Tentukan nilai frekuensi getaran keseimbangan dan ketakharmonikan molekul ini.

(10 markah)

- (b) Dengan menganggap nombor kuantum getaran v sebagai pembolehubah kepada tenaga getaran E_v , tentukan (dengan menggunakan kalkulus dan data apda (a) di atas) nilai tenaga penceraian spektroskopi molekul $N^{14}O^{16}$ dan seterusnya tenaga penceraian keseimbangannya.

(15 markah)

4. (a) Huraikan dan tunjukkan pengwujudan kepada jalur dan ekor jalur dalam spektrum putaran tulen bagi kebanyakan molekul.

(13 markah)

- (b) Pertimbangkan molekul MX_6 yang berbentuk oktahedral.

- (i) Berapakah bilangan mod getaran normal yang ada dalam molekul itu?

- (ii) Yang mana satu daripada getaran-getaran itu ialah tak aktif inframerah dan tak aktif Raman?
- (iii) Senaraikan getaran-getaran yang aktif inframerah.
- (iv) Senaraikan getaran-getaran yang aktif Raman.
- (v) Senaraikan getaran-getaran yang sama-sama aktif inframerah dan aktif Raman (jika ada).

(12 markah)

5. (a) Konfigurasi elektron keadaan asas bagi atom kuprum ialah $[[3d^{10}4s^1]$. Tentukan simbol sebutan keadaan ini dan keadaan teruja pertama yang boleh diduduki oleh elektorn mengikut peraturan pemilihan. Adakah wujud keadaan teruja lain yang lebih rendah tenaganya? Jelaskan.

(10 markah)

- (b) Tentukan simbol-simbol sebutan keadaan asas dan teruja pertama yang boleh diduduki mengikut peraturan pemilihan bagi molekul NO. Adakah wujud keadaan teruja lain yang lebih rendah tenaganya? Jelaskan.

(10 markah)

- (c) Dalam spektrum ultralembayang ternampakan bagi kebanyakan molekul jalur yang berkeamatan maksimum biasanya terdiri daripada jalur-jalur getaran dan bukan jalur peralihan elektorn ($V = 0 \longrightarrow V' = 0$). Jelaskan fenomena ini.

(5 markah)

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Pusat Pengajian Sains Kimia

Pemalar Asas dalam Kimia Fizik

<u>Simbol</u>	<u>Keterangan</u>	<u>Nilai</u>
N_A	Nombor Avogadro	$6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
F	Pemalar Faraday	$96,500 \text{ C mol}^{-1}$, atau coulomb per mol, elektron
e	Cas elektron	$4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}$ $1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$ atau coulomb
m_e	Jisim elektron	$9.11 \times 10^{-28} \text{ g}$ $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
m_p	Jisim proton	$1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
h	Pemalar Planck	$6.626 \times 10^{-27} \text{ erg s}$ $6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$
c	Halaju cahaya	$3.0 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$ $3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
R	Pemalar gas	$8.314 \times 10^7 \text{ erg K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0.082 \text{ l atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $1.987 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
k	Pemalar Boltzmann	$1.380 \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$ $1.380 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$
g		981 cm s^{-2} 9.81 m s^{-2}
1 atm		76 cmHg $1.013 \times 10^6 \text{ dyne cm}^{-2}$ $101,325 \text{ N m}^{-2}$
$2.303 \frac{RT}{F}$		0.0591 V , atau volt, pada 25°C

Berat Atom yang Berguna

H = 1.0	C = 12.0	I = 126.9	Fe = 55.8	As = 74.9	Sn = 118.7
Br = 79.9	Cl = 35.5	Ag = 107.9	Pb = 207.0	Xe = 131.1	
Na = 23.0	K = 39.1	N = 14.0	58.9 Cu = 63.5	F = 19.0	
O = 16.0	S = 32.0	P = 31.0	Ca = 40.1	Mg = 24.0	